	Cabinet Conseil BLONDEL	Nature du document : **Rapport**

Destinataires : M. Hafid BAROUDI / M^{elle} Claire ROLLIN **INERIS** Parc Technologique ALATA – B.P. N°2 60 550 VERNEUIL-EN-HALATTE	*Copie* : M. Michel GARCIA **FSS International r&d** 1956, av. R. Salengro 92370 CHAVILLE

INERIS

Projet **TRANSPOL**

Intercomparaison des méthodes et des modèles de migration de polluants dans les sols et les eaux

Cas réel n°1 : CR1 version 1.0

Etude d'une pollution par des HAP

Modélisation numérique avec Visual MODFLOW v. 3.0

Programme 2001 – Volet 2

Auteur : Thierry Blondel

Cabinet-Conseil BLONDEL
Le Parc Technologique de Lyon
12, allée Irène Joliot-Curie – Bâtiment B2
69791 SAINT-PRIEST CEDEX

Nos Références : TBL_017/02	Référence Client : Commande initiale **INERIS** n° CNS0001041 du 23 Juillet 1999 (Comm. FSSI : CCB 001092001)	Date d'émission : 30 janvier 2002

SOMMAIRE

pages

1. Objet de l'étude ____ ***3***

2. Description des tâches ____ ***4***

3. Cadre de l'étude ____ ***4***

4. Résultats ____ ***5***

4.1 Cas 1 : Modèle hydrodispersif sans sorption ____ **9**

4.2 Cas 2 : Modèle hydrodispersif avec sorption ____ **11**

4.3 Cas 3 : Modèle hydrodispersif avec sorption et biodégradation ____ **12**

5. Conclusions ____ ***15***

ANNEXES :

Annexe A : Proposition d'une « Charte de Bonne Pratique » pour la réalisation de modélisations en écoulement et en transport de polluants.

Annexes 1-02 à 14-02 : **Modèle 1** (convection + dispersion) : Simulation du panache polluant en Naphtalène dissous (de + 40 ans à + 200 ans), dans la nappe des Graves et dans la nappe de la Craie (vues en plan et vues en coupes N-S et E-W).

Annexes 15-02 à 28-02 : **Modèle 2** (convection + dispersion + sorption) : Simulation du panache polluant en Naphtalène dissous (de + 40 ans à + 200 ans), dans la nappe des Graves et dans la nappe de la Craie (vues en plan et vues en coupes N-S et E-W).

Annexes 29-02 à 40-02 : **Modèle 3** (convection + dispersion + sorption + biodégradation) : Simulation du panache polluant en Naphtalène dissous (de + 40 ans à + 200 ans), dans la nappe des Graves et dans la nappe de la Craie (vues en plan et vues en coupes N-S et E-W).

Annexes 41-02 à 45-02 : **Modèle 3** (convection + dispersion + sorption + biodégradation) : Evolutions simulées des concentrations aux droit des piézomètres implantés dans la nappe des Graves, dans la nappe de la Craie et au droit des points d'observation considérés. Histogrammes de calibration des concentrations observées/calculées pour la nappe des Graves et pour la nappe de la Craie.

Annexes 46-02 à 48-02 : **Comparaisons des résultats des trois modèles** : Comparaison des résultats de simulations obtenues par les trois modèles pour la nappe superficielle des Graves, pour la nappe de la Craie et pour les points d'observations considérés.

1. OBJET DE L'ETUDE

Dans la démarche de diagnostic et d'évaluation détaillée des risques que présentent les sites pollués, la connaissance du devenir des polluants dans l'espace et dans le temps est de plus en plus indispensable.

Dans ce but, l'utilisation de codes de calculs, analytiques ou numériques et en complément d'une caractérisation d'un site pollué, semble incontournable.

Pour rendre compte des phénomènes de transfert potentiel de polluants au niveau des sols et des eaux souterraines, de nombreux codes, commerciaux ou du domaine public, sont disponibles sur le marché. Une grande partie des codes du domaine public sont issus de projets de recherche et développement initiés et/ou financés par des organismes publics américains en charge de près ou de loin des problèmes environnementaux liés à la pollution des sols et des eaux, dont principalement l'USEPA, l'AFCEE et l'USGS. Parmi les codes commerciaux, beaucoup proviennent du secteur pétrolier où l'intérêt pour les écoulements polyphasiques et compositionnels existe depuis plusieurs dizaines d'années.

La plupart des phénomènes physico-chimiques en jeu dans le transfert de polluants en milieu poreux souterrain saturé ou non, dont les mécanismes d'atténuation naturelle (dispersion, sorption, biodégradation, etc.), sont aujourd'hui assez bien maîtrisés et intégrés dans ces codes de calculs.

Face à un nombre important de codes commerciaux et du domaine public disponibles sur le marché à l'heure actuelle, à une demande grandissante quant à leur utilisation pour la réalisation d'évaluation détaillée de risques dans le cadre d'audits environnementaux, et à la complexité de mise en œuvre de ces codes, qui demandent pour la plupart des connaissances multidisciplinaires et une expérience spécifique, le Ministère de l'Aménagement du Territoire et de l'Environnement a demandé à l'**INERIS** d'animer un groupe de travail pour préciser les modalités de choix et d'utilisation de codes de transfert de produits polluants, en s'attachant dans un premier temps au cas des pollutions de sols et de nappes par des HAP.

A la demande de l'**INERIS**, ***FSS International r&d*** et le ***Cabinet-Conseil BLONDEL*** participent à ce groupe de travail sur la base de sa capacité et de son retour d'expérience dans le domaine de la modélisation d'écoulements polyphasiques et du transfert de polluants en milieu poreux, de sa connaissance et de sa maîtrise de nombreux codes de simulation, ainsi que par ses compétences en matière de compréhension et d'élaboration de codes de calcul permettant la simulation des écoulements mono- et polyphasiques.

La présente étude a pour objectif la modélisation du **cas-réel n°1** proposé dans le projet **TRANSPOL** défini par l'**INERIS** dans son cahier des charges en date du 20 juillet 1999. Ce cas réel concerne l'étude d'une pollution par des HAP sous forme dissoute ayant un impact sur un aquifère de type bicouche ; les deux couches aquifères étant séparées par un horizon argileux d'une dizaine de mètres d'épaisseur.

2. DESCRIPTION DES TACHES

Le cahier des charges défini par l'**INERIS** concerne un **cas-réel** d'un ancien site industriel dont les sols présentent une contamination par des HAP (hydrocarbures aromatiques polycycliques).

D'après les renseignements fournis par l'**INERIS**, d'un point de vue hydrogéologique le site comporte deux aquifères superposés séparés par un horizon intermédiaire aquiclude, « imperméable » et argileux.

L'aquifère supérieur est constitué par des graves ; la nappe présente dans cet aquifère est du type nappe libre.

L'aquifère inférieur est constitué par de la craie ; la nappe présente dans cet aquifère est du type nappe captive.

L'horizon « imperméable » en terme d'écoulement séparant ces deux aquifères est constitué par les Argiles de Louvil.

La pollution par des HAP sous forme dissoute affecte actuellement la qualité des eaux de la nappe libre peu profonde de l'aquifère supérieur graveleux.

Le but de l'étude est de modéliser la migration potentielle des HAP, en phase dissoute, à travers l'horizon intermédiaire argileux faisant office de couverture pour la nappe captive de l'aquifère inférieur crayeux.

3. CADRE DE L'ETUDE

Pour la résolution du problème posé, et sur la base de la connaissance préalable de certains paramètres en jeu dans le **cas-réel n°1** tel que défini dans le cahier des charges de l'**INERIS**, *FSS International r&d* a été amené à utiliser la dernière version du logiciel **Visual MODFLOW** (version 3.0 de 2001-2002), distribué par Waterloo Hydrogeologic Inc. (Canada).

Ce logiciel utilise les dernières versions des codes de calcul suivant, fonctionnant par différences finies : Win^{32} MODFLOW Suite avec MODFLOW-2000 pour les écoulements, MODPATH pour la trajectométrie de particules dissoutes, et RT3D - MT3DMS - MT3D99 pour le transport de substances polluantes en phase dissoute, de type compositionnel et avec prise en compte des phénomènes d'atténuation naturelle, tels la dispersion, la sorption et la biodégradation (MT3DMS), et de réactions géochimiques en milieu aérobie ou anaérobie (RT3D et MT3D99).

Nous rappelons que Visual MODFLOW a été pour la première fois mis sur le marché en 1994, et que, à l'heure actuelle, ce logiciel est utilisé par plus de 5000 consultants du domaine public ou privé, décideurs et formateurs spécialisés en hydrogéologie appliquée et en modélisation hydrodispersive, de par le monde.

4. RESULTATS

Nous présentons en annexe les principaux résultats concernant les trois cas de modélisation hydrodynamique et hydrodispersive réalisés dans le cadre de cette étude.

Les cartes utilisées pour l'élaboration du schéma conceptuel du domaine étudié, tant d'un point de vue géologique qu'hydrogéologique, ont déjà été présentées dans notre rapport d'étape édité par ***FSS International r&d*** (rapport n° 1999/10_TBL du 22 décembre 1999), repris dans la synthèse réalisée par l'**INERIS** (Programme DRS-01 : **TRANSPOL** : Volume 2 : Recueil des rapports techniques – 30 janvier 2001 ; cf. Rapport ***FSS International r&d*** : Annexes 1 à 4 : cartes d'extrapolation de la topographie, du toit des Argiles de Louvil, et du toit et du mur de l'aquifère de la Craie ; Annexes 5 à 6 : cartes d'extrapolation de la piézométrie de la nappe superficielle des graves, et de la nappe de la Craie).

L'élaboration du modèle numérique, par discrétisation du domaine défini dans le cahier des charges fourni par l'**INERIS**, puis par superposition des données et paramètres d'ordre géologique et hydrogéologique, et enfin par définition des conditions aux limites du domaine modélisé en potentiels imposés, est présentée ensuite sous la forme de cartes et de coupes W-E et N-S (Programme DRS-01 : **TRANSPOL** : Volume 2 : Recueil des rapports techniques – 30 janvier 2001 ; cf. Rapport ***FSS International r&d*** : Annexes 7 à 14).

Les paramètres pris en compte pour la réalisation de la simulation numérique en écoulement et en transport sont conformes à ceux décrits et préconisés dans le cahier des charges fourni par l'**INERIS** :

Unité lithologique :	**Coefficients de perméabilité :**
Aquifère superficiel des Graves	en partie Ouest : $K = 2{,}5.10^{-5}$ m/s en partie Est : $K = 5.10^{-5}$ m/s
Argiles de Louvil	$K = 3.10^{-9}$ m/s
Aquifère inférieur de la Craie	en partie Nord : $K = 2.10^{-4}$ m/s en partie Sud : $K = 4{,}5.10^{-4}$ m/s

Des variations dans les coefficients de perméabilité, pour différentes parties du domaine discrétisé concernant l'aquifère des graves et l'aquifère de la craie, ont été introduites afin de mieux caler la simulation en écoulement avec les piézométries des nappes considérées réellement mesurées sur site.

Les coefficients d'emmagasinement spécifique et de porosité pris en compte dans les simulations numériques réalisées sont les suivants (données mises à jour pour partie, suite à de nouvelles études menées par l'**INERIS** en 2000 et aux interprétations réalisées par ANTEA) :

Unité lithologique :	Ss (specific storage) [m^{-1}]	Sy (specific yield)	Porosité efficace	Porosité totale
Aquifère superficiel des Graves	$1,7.10^{-6}$	0,18	0,18	0,35
Argiles de Louvil	7.10^{-6}	0,02	0,02	0,4
Aquifère inférieur de la Craie	1.10^{-5}	0,03	0,03	0,2

La recharge par les précipitations et par la substance polluante dissoute considérée a été ensuite introduite dans le modèle numérique.

Pour les simulations hydrodispersives, nous avons pris en compte le **Naphtalène** sur l'ensemble des HAP potentiellement dissous et présents dans les eaux souterraines du cas d'étude considéré ici.
Il s'agit en effet de l'élément le plus soluble des HAP, donc le plus mobile, et il est donc le plus représentatif de l'étalement d'un front de pollution par des HAP sous forme dissoute.

Nous avons considéré comme origine de la pollution deux zones sources implantées au niveau du site étudié dans le cas-réel 1 : la première zone source implantée au droit et en périphérie du piézomètre Pz20, et la seconde zone source implantée au droit et en périphérie du piézomètre Pz8 (Programme DRS-01 : **TRANSPOL** : Volume 2 : Recueil des rapports techniques – 30 janvier 2001 ; cf. Rapport ***FSS International r&d*** : Annexe 15).

Pour les trois modèles hydrodispersifs réalisés - sans sorption ni dégradation, avec sorption mais sans dégradation, et enfin avec sorption et dégradation - les paramètres de dispersion pris en compte sont les suivants (données fournies par l'**INERIS**) :

Unité lithologique :	Dispersion Longitudinale [m]	Dispersion Horizontale / Longitudinale	Dispersion Horizontale / Verticale	Coefficient de Diffusion moléculaire [m^2/jour]
Aquifère superficiel des Graves	40	0,1	0,01	0
Argiles de Louvil	5	0,1	0,01	1.10^{-6}
Aquifère inférieur de la Craie	70	0,1	0,01	0

La première phase de la simulation numérique, utilisant le code de calcul MODFLOW, a permis de simuler la piézométrie des différentes nappes considérées dans le cas-réel 1, et de récupérer ainsi les champs de vitesses et les flux associés pour chacun des aquifères.

Les résultats de cette modélisation hydrodynamique, réalisée en régime permanent, sont présentés sous forme de cartes et de coupes N-S pour chacune des unités lithologiques considérées (aquifère libre des Graves, horizons "imperméables" des Argiles de Louvil et aquifère captif de la Craie ; cf. Programme DRS-01 : **TRANSPOL** : Volume 2 : Recueil des rapports techniques – 30 janvier 2001 ; Rapport ***FSS International r&d*** : Annexes 16 à 19).

Ces champs de vitesses ont par la suite été utilisés pour la simulation du modèle hydrodispersif réalisé en utilisant le code MT3DMS ; ces champs de vitesses servent en effet de "moteur" principal au transport de polluant en phase dissoute par les eaux souterraines des aquifères considérés.

Dans la présente étude, venant en complément de celle réalisée en 1999 par ***FSS International r&d*** (rapport n° 1999/10_TBL du 22 décembre 1999), les résultats préliminaires de la modélisation hydrodispersive, ainsi que les résultats des calages réalisés, sont donnés sous forme de cartes, de coupes W-E et N-S et de graphes.

Ces **sorties graphiques et cartographiques** concernent **trois cas** de modèles réalisés :

- **Cas 1 : Modèle hydrodispersif sans sorption** (cf. **Annexes 1-02 à 14-02**) ;
- **Cas 2 : Modèle hydrodispersif avec sorption** (cf. **Annexes 15-02 à 28-02**) ;
- **Cas 3 : Modèle hydrodispersif avec sorption et biodégradation** (cf. **Annexes 29-02 à 45-02**).

Les **comparaisons entre les résultats de simulation de ces trois modèles** sont reportées en **Annexes 46-02 à 48-02** du présent rapport.

Nous avons en effet réalisé dans un **premier temps** une modélisation hydrodispersive sans prendre en compte les phénomènes d'atténuation naturelle, tels la sorption ou la biodégradation de composés organiques dissous (**Cas 1**).

Il s'agit là d'une hypothèse conservatrice et majorante, ne considérant pour le transport de substances dissoutes que les phénomènes d'étalement, et donc de dilution, du front de pollution par dispersion mécanique et diffusion moléculaire.

Ces phénomènes de dispersion se superposent aux phénomènes convectifs, induits par la circulation des eaux souterraines en milieu poreux ; ils créent ainsi un étalement du front de pollution ou du panache polluant en fonction du temps et de la distance parcourue par les particules d'eau chargées en soluté circulant à travers un milieu aquifère saturé.

Rappelons ici que le mouvement convectif des particules d'eau chargée en substances dissoutes constitue **le** principal vecteur de transfert de soluté en milieu poreux saturé.

Dans un **second temps** (**Cas 2**), nous avons repris le même modèle hydrodispersif mais en considérant cette fois, en tant qu'hypothèse plus réaliste (moins majorante) du devenir de polluant se dispersant dans un milieu poreux souterrain, la sorption du **Naphtalène** dissous sur la matrice du milieu poreux saturé.

Il s'agit du paramètre de l'atténuation naturelle qui introduit un facteur de retard sur le transport de substance polluante en phase dissoute (voir synthèse sur ce paramètre réalisée par le ***Cabinet-Conseil BLONDEL*** : rapport TBL_017/02-b de février 2002).

La prise en compte de paramètres de sorption différents, selon les types de faciès lithologiques reconnus au droit du site étudié dans le cas-réel 1, a permis d'affiner le calage en transport de polluant en phase dissoute dans le milieu poreux saturé.

Les **paramètres de sorption du Naphtalène** pris en compte pour le 2ème modèle (Cas 2) sont, **en fonction des unités lithologiques considérées**, les suivants (données fournies, pour partie, par l'**INERIS**) :

Unité lithologique :	**Coefficient de partition : Kd [L/mg]**
Aquifère superficiel des Graves	5.10-6
Argiles de Louvil	1,3.10-5
Aquifère inférieur de la Craie	5.10-7

Dans un **troisième temps** (**Cas 3**), nous avons repris le modèle hydrodispersif du Cas 2 en considérant, en plus de la sorption, la biodégradation comme paramètre de l'atténuation naturelle. Ce paramètre introduit une diminution des teneurs en substances organiques dissoutes dans les eaux souterraines en fonction du temps et de la distance parcourue (voir synthèse sur ce paramètre réalisée par le ***Cabinet-Conseil BLONDEL*** : rapport TBL_017/02-b de février 2002).

La biodégradation du **Naphtalène** dissout a été considérée comme équivalente à un temps de demi-vie : $\mathbf{T_{1/2} \cong 1}$ **an ou 365 jours**, ce qui correspond à une **constante λ de biodégradation de premier ordre** égale à :

$$\lambda = \ln 2 / T_{1/2} \cong 0.693 / 365 \cong 2.10^{-3} \text{ jour}^{-1}.$$

Ce taux de biodégradation a été appliqué, dans la simulation concernée (Cas 3), seulement dans l'aquifère de la **nappe des graves** ; il est en effet fort probable qu'en profondeur, au niveau des Argiles de Louvil puis de la nappe de la Craie, le taux de dégradation du soluté de Naphtalène soit quasiment nul eut égard aux conditions réductrices (ou peu oxygénée) de ces niveaux stratigraphiques.

Ce choix a aussi été fait pour permettre de simuler un potentiel de transfert de soluté au travers des Argiles de Louvil, et donc une atteinte potentielle de la nappe de la Craie sous-jacente (ce qui est vérifié par les mesures sur site effectuées au droit des piézomètres implantés dans la nappe de la Craie).

L'introduction d'un paramètre de biodégradation au niveau des deux couches sous-jacentes à l'aquifère supérieur des Graves n'a pas permis, en effet, de simuler un transfert de soluté : tout le soluté était alors considéré comme « dégradé » lors du transfert à travers ces couches, et il n'y avait plus « atteinte potentielle » de la nappe de la Craie par le soluté de Naphtalène, du moins en prenant en compte le temps de demi-vie d'environ une année pour ce soluté.

Nous précisons que la période de demi-vie du Naphtalène dissous, considérée ici de l'ordre d'une année, est issue de données tirées de la littérature ; ces données sont fondées en majorité sur des résultats de tests de biodégradation sur colonne réalisées en laboratoire.

Il faut considérer ce taux comme **majorant**, car il est connu que les conditions de laboratoire ne représentent jamais ou rarement les conditions naturelles du milieu souterrain.

En ce qui concerne l'estimation des taux de biodégradation de produits organiques dissous, ces derniers sont très largement influencés par les variations spatiales et temporelles des conditions physico-chimiques (pH, Eh, etc.) et biochimiques (potentiel et type d'activités bactériennes, etc.) du milieu poreux saturé ainsi que par les teneurs en oxygène dissous dans les eaux souterraines et la présence et la quantité disponible d'ions minéraux dits « accepteurs d'électrons » (voir synthèse sur la biodégradation réalisée par le ***Cabinet-Conseil BLONDEL*** : rapport TBL_017/02-b de février 2002).

Pour chacun des trois modèles hydrodispersifs ainsi définis, la simulation en transport a été réalisées en **régime permanent** et sur une période totale de temps couvrant **200 ans** (soit **environ 73000 jours**).

Pour les trois simulations ainsi réalisées, la recharge en Naphtalène sous forme dissoute, contaminant les eaux souterraines de la nappe supérieure des Graves, a été définie au droit des zones polluées préalablement délimitées à partir du cahier des charges fourni par l'**INERIS** en 1999 (voir plus haut).

Nous avons considéré que la source de pollution pour le site étudié avait débuté il y a 40 ans, soit au début des années 1960 ; la simulation s'étendant sur une période de 200 ans au total, elle s'arrête donc à + 160 ans par rapport à la période actuelle.

Les **mesures sur site** réalisées actuellement ont été utilisées pour le **calage en écoulement et en transport**, supposé correspondre à un calage en **régime permanent** : conditions aux limites en écoulement « moyen », potentiels imposés et paramétrage des modèles ne variant pas avec le temps, et recharge pérenne et stabilisée depuis 40 ans à partir des zones polluées en substance organique dissoute, soit ici en **Naphtalène**.

4.1 Cas 1 : Modèle hydrodispersif sans sorption

Le premier modèle, purement hydrodispersif (cf. **Annexes 1-02 à 14-02**) et réalisé en utilisant les champs de vitesses et les flux simulés par la modélisation hydrodynamique, montre un assez bon calage en transport de soluté (courbes de restitution du **Cas 1** au niveau des piézomètres de suivi, pour les deux nappes, données en **Annexes 46-02 à 48-02**).

Pour la **nappe des Graves** (**Annexe 46-02**), les valeurs calculées à 14600 jours (40 ans de simulation hydrodispersive depuis le début de la pollution des sols et des nappes : simulation de l'état actuel du panache polluant) en Pz8 et en Pz18 sont surestimées, alors que pour les autres valeurs calculées, les résultats sont assez proches des valeurs mesurées actuellement.

On remarque que les valeurs de concentration en Naphtalène dissous ont atteint à l'heure actuelle (14600 jours ou 40 ans après le départ de la simulation de l'injection de polluant au droit des zones sources considérées) un "plateau" (cf. régime permanent ou stabilisé) dans l'évolution des concentrations pour les points de mesures situés en périphérie proche des zones sources (Pz4, Pz5, Pz8, Pz18, etc.) ; dans cette simulation, ce plateau n'est toujours pas atteint pour le piézomètre implanté actuellement le plus loin des zones sources : Pz17.

Pour la **nappe de la Craie** (**Annexe 47-02**), les valeurs de concentration en Naphtalène dissous simulées au droit des piézomètres Pz10, Pz12 et Pz13 atteignent elles aussi un plateau, mais à des teneurs environ 10 fois plus faibles que pour les teneurs simulées au droit des piézomètres implantés dans la nappe des Graves. Le piézomètre implanté dans la nappe de la craie le plus atteint est le Pz12, alors que le Pz7, non représenté ici, ne montre aucune atteinte par des substances dissoutes.

Le graphe pour le Cas 1 donné en **Annexe 48-02** montre l'évolution possible des teneurs en Naphtalène dissous au droit des points d'observation implantés sur le domaine modélisé, selon les coordonnées fournies par l'**INERIS** pour le cas-réel 1 (**Obs1 à Obs10**).

On remarque que ce sont les points d'observation Obs1 et Obs4, implantés en périphérie proche au Sud des zones sources de pollution considérées, qui sont le plus atteints par le panache polluant.
Le plateau dans les concentrations simulées n'est atteint que pour les points d'observation Obs1 et Obs4.

Les cartes et coupes fournies en annexe (cf. **Annexes 1-02 à 14-02**) montrent l'évolution potentielle du panache polluant en Naphtalène dissous pour le modèle étudié, dans le cas d'une simulation hydrodispersive **sans prise en compte de phénomène d'atténuation naturelle** (sans sorption ni biodégradation).

On remarque sur les coupes N-S et E-W que le panache de polluant dissous traverse les Argiles de Louvil malgré des vitesses d'écoulement faibles et très lentes (écoulement gravitaire par drainance à travers l'horizon "imperméable" argileux).
Ce transfert de soluté à travers une « barrière dite imperméable » est possible si l'on considère les phénomènes de drainance, très lents, et surtout les phénomènes diffusifs (diffusion moléculaire). Ces phénomènes, très lents eux aussi, ne nécessitent aucun mouvement convectif ; ils deviennent possibles pour peu que le milieu soit saturé en eau et qu'il existe un gradient de concentration en soluté, par exemple entre le toit « pollué » et le mur « non pollué » d'une couche « semi-perméable à imperméable », comme c'est le cas ici pour les Argiles de Louvil.

Le panache résultant atteint l'aquifère inférieur crayeux avec une atténuation importante, et donc des teneurs assez faibles, comparée aux teneurs estimées pour l'aquifère superficiel graveleux, qui est, lui, fortement atteint latéralement par la pollution en soluté de Naphtalène.

En résumé : l'horizon "imperméable" des Argiles de Louvil fonctionne comme une "barrière naturelle" vis-à-vis des écoulements, mais non vis-à-vis des substances polluantes dissoutes qui finissent par traverser par dispersion/diffusion cette "barrière".
Du fait de leur lenteur, ces phénomènes de dispersion/diffusion, à travers l'horizon argileux de couverture, occasionnent une forte « atténuation » des teneurs résultantes en soluté de Naphtalène dans la nappe de la Craie sous-jacente.

4.2 Cas 2 : Modèle hydrodispersif avec sorption

Le deuxième modèle, hydrodispersif avec sorption (cf. **Annexes 15-02 à 28-02**), réalisé en utilisant les champs de vitesses et les flux simulés par la modélisation hydrodynamique, montre un meilleur calage en transport de soluté (courbes de restitution du **Cas 2** au niveau des piézomètres de suivi, pour les deux nappes, données en **Annexes 46-02 à 48-02**).

Pour la **nappe des Graves** (**Annexe 46-02**), les valeurs calculées à 14600 jours (40 ans de simulation avec prise en compte de la sorption depuis le début de la pollution des sols et des nappes : simulation de l'état actuel du panache polluant) en Pz8 sont légèrement sous-estimées alors qu'en Pz18 elles restent surestimées ; l'écart-type entre les valeurs calculées et celles mesurées est cependant moins important que pour le cas précédent qui ne prenait pas en considération les phénomènes de sorption (Cas 1).
Pour les autres valeurs calculées, les résultats sont assez proches des valeurs mesurées actuellement.

On remarque que pour ce cas simulé dans la nappe des Graves avec prise en compte de paramètres de sorption (Cas 2), les valeurs de concentration en Naphtalène dissous atteignent plus tardivement un plateau dans l'évolution des concentrations en fonction du temps (cf. régime permanent ou stabilisé) que dans le cas précédent, considéré sans sorption (Cas 1) ; cela n'est cependant valable que pour les piézomètres proches à peu éloignés des zones sources considérées (Pz8, Pz18, Pz5, Pz4,..).

Pour la **nappe de la Craie** (**Annexe 47-02**), les valeurs de concentration en Naphtalène dissous simulées au droit des piézomètres Pz10, Pz12 et Pz13 n'atteignent pas de plateau, contrairement au cas précédent ne prenant pas en compte la sorption (Cas 1).
Pour ce cas de simulation, en considérant la sorption, le régime en transport n'est pas stabilisé,et les teneurs vont continuer d'évoluer dans la nappe de la Craie pendant plusieurs dizaines d'années après la limite à + 160 ans de la simulation, par rapport à l'actuel situé à + 40 ans par rapport au temps d'origine de la simulation.
Là encore, le piézomètre de la nappe de la craie le plus atteint reste le Pz12, alors que, comme précédemment, le Pz7, toujours non représenté ici, ne montre aucune atteinte par des substances dissoutes.

Ces résultats montrent que les unités lithologiques considérées dans le cas-réel 1 présentent un assez fort pouvoir de rétention par sorption.
Cette sorption de soluté sur la matrice solide du milieu poreux saturé introduit un **phénomène de retard** bien visible sur les courbes de restitution simulées ; ce phénomène influence assez fortement le transport de soluté de Naphtalène à travers le milieu souterrain.

Le graphe pour le Cas 2 donné en **Annexe 48-02** montre l'évolution possible des teneurs en Naphtalène dissous au droit des points d'observation implantés sur le domaine modélisé selon les coordonnées fournies par l'**INERIS** pour le cas-réel 1 (**Obs1 à Obs10**).

On remarque là encore que ce sont les points d'observation Obs1 et Obs4, implantés en périphérie proche au Sud des zones sources de pollution considérées, qui sont le plus atteints par le panache polluant.
L'influence du retard introduit par les phénomènes de sorption est là aussi nettement visible, en comparaison avec les mêmes courbes de restitution pour le Cas 1. Ainsi, le plateau dans les concentrations simulées dans le Cas 2 n'est atteint que pour le point d'observation Obs1.

Les cartes et coupes fournies en annexe (cf. **Annexes 15-02 à 28-02**), montrent l'évolution potentielle du panache polluant en Naphtalène dissous pour le modèle étudié, dans le cas d'une simulation hydrodispersive **avec prise en compte de phénomène de retard** (avec sorption).

On remarque sur les coupes N-S et E-W que le panache de polluant dissous traverse plus lentement et plus tardivement les Argiles de Louvil que pour le cas précédent.
Ce transfert à travers l'horizon "imperméable" argileux s'effectue encore plus lentement, principalement par écoulement gravitaire/drainance et par dispersion/diffusion, mais avec un retard marqué dans les temps d'arrivée de soluté.
En conséquence, pour le Cas 2 le panache polluant qui atteint l'aquifère inférieur crayeux est beaucoup moins prononcé que pour le Cas 1 modélisé sans prise en compte des paramètres de sorption.

Là encore, nous pouvons mettre en évidence par la simulation numérique réalisée, que l'horizon "imperméable" des Argiles de Louvil, s'il fonctionne comme une "barrière" vis-à-vis des écoulements qui deviennent gravitaires et avec des vitesses très faibles, n'est absolument pas étanche aux polluants dissous qui traversent par dispersion/diffusion cette "barrière".

Du fait du potentiel de sorption important des Argiles de Louvil, le transfert de soluté à travers cet horizon, simulé dans le Cas 2, est encore plus atténué que pour le cas précédent (Cas 1).

En résumé : pour le cas 2, le panache résultant affectant la **nappe de la Craie** est très atténué par rapport au panache polluant qui affecte de manière plus prononcée, mais avec une extension latérale moins importante que pour le Cas 1, la nappe des Graves.

4.3 Cas 3 : Modèle hydrodispersif avec sorption et biodégradation

Le troisième modèle, hydrodispersif et avec prise en compte des phénomènes de l'atténuation naturelle : sorption et biodégradation (cf. **Annexes 29-02 à 45-02**), a été réalisé en utilisant les champs de vitesses et les flux simulés par la modélisation hydrodynamique.
Il montre encore un meilleur calage en transport de soluté (courbes de restitution du **Cas 3** au niveau des piézomètres de suivi, pour les deux nappes, données en **Annexes 46-02 à 48-02**).

Rappelons ici que le taux de **biodégradation** du Naphtalène dissous, considéré dans la simulation, n'a été appliqué que pour l'aquifère de la **nappe des Graves** (voir plus haut).

Pour la **nappe des Graves** (**Annexe 46-02**), les valeurs calculées à 14600 jours (40 ans de simulation avec prise en compte de la sorption depuis le début de la pollution des sols et des nappes : simulation de l'état actuel du panache polluant) en Pz8 et en Pz18 sont assez bien calées ; l'écart-type par rapport aux valeurs mesurées est très faible pour ce cas (Cas 3), par rapport aux simulations précédentes (cas 1 et 2) (cf. **Annexes 41-02 et 44-02**).
Pour le Pz5, les valeurs calculées sont légèrement sous-estimées, mais, pour l'ensemble des points de mesures implantés dans la nappe des Graves, les valeurs calculées restent très proches des valeurs mesurées actuellement (à + 40 ans par rapport à l'origine de la simulation).

On remarque de manière très nette ici que pour ce cas simulé dans la nappe des Graves avec prise en compte des phénomènes d'atténuation naturelle : sorption et biodégradation (Cas 3), les valeurs de concentration en Naphtalène dissous atteignent encore plus tardivement un plateau dans l'évolution des concentrations en fonction du temps (cf. régime permanent ou stabilisé) que dans le cas précédent, considéré sans sorption (Cas 1).

Cela n'est cependant valable que pour les piézomètres proches à peu éloignés des zones sources considérées (Pz8, Pz18, Pz5, Pz4,…) ; pour l'ensemble des piézomètres « éloignés » des zones sources de pollution, le régime « stabilisé » en transport de soluté n'est pas atteint sur la durée de simulation réalisée (200 ans).

Pour la **nappe de la Craie** (**Annexe 47-02**), les valeurs de concentration en Naphtalène dissous simulées au droit des piézomètres Pz10, Pz12 et Pz13 restent en phase « ascendante » et n'atteignent *a fortiori* pas de plateau pour la durée de simulation considérée (200 ans).

Le piézomètre de la nappe de la craie le plus atteint est dans ce cas le Pz10.
Les teneurs calculées au droit des Pz10, Pz11 et Pz12 sont cependant beaucoup plus faibles (d'un facteur 10 à 100 !!) que pour les cas simulés précédemment (Cas 1 et 2) ; le Pz7 quant à lui ne montre aucune atteinte par des substances dissoutes.

Le cas simulé ici (Cas 3), prenant en compte les phénomènes d'atténuation naturelle (sorption sur l'ensemble des couches et biodégradation du soluté appliquée à l'aquifère supérieur des graves), montre la meilleure corrélation entre les valeurs calculées et les valeurs mesurées, assez faibles actuellement, au droit des piézomètres implantés dans la **nappe de la Craie** (cf. **Annexes 42-02 et 45-02**).

Ces résultats montrent que l'unité lithologique constituant l'aquifère supérieur des Graves présente non seulement un assez fort pouvoir de rétention par sorption, comme pour les autres couches considérées dans le cas-réel 1 (cf. Cas 2), mais aussi un pouvoir de biodégradation non négligeable pour le soluté de Naphtalène considéré (Cas 3).

Les **phénomènes d'atténuation naturelle**, affectant le transport de soluté de Naphtalène dans la nappe supérieure des Graves, influencent grandement l'impact potentiel sur le substratum de cette nappe superficielle constitué par les Argiles de Louvil, et donc *a fortiori* sur la nappe de la Craie sous-jacente.

Le graphe pour le Cas 3 donné en **Annexe 48-02** montre l'évolution possible des teneurs en Naphtalène dissous au droit des points d'observation implantés sur le domaine modélisé selon les coordonnées fournies par l'**INERIS** pour le cas-réel 1 (**Obs1 à Obs10**).

On remarque que ce sont les points d'observation Obs1 et Obs3, implantés en périphérie proche autour des zones sources de pollution considérées, qui sont le plus atteints par le panache polluant.

L'influence de la biodégradation est nettement visible pour le Cas 3, en comparaison avec les mêmes courbes de restitution pour les Cas 1 et 2. Les teneurs calculées (simulées) sont ainsi globalement réduites d'un facteur 10 par rapport aux teneurs calculées pour le Cas 2.
Pour le cas 3, le plateau dans les concentrations simulées n'est jamais atteint sur l'ensemble des points d'observation et pour la durée de simulation considérée (200 ans).

Les cartes et coupes fournies en annexe (cf. **Annexes 29-02 à 40-02**), montrent l'évolution potentielle du panache polluant en Naphtalène dissous pour le modèle étudié, dans le cas d'une simulation hydrodispersive **avec prise en compte des phénomènes de l'atténuation naturelle que sont la sorption et la biodégradation**.

Sur l'ensemble des cartes et des coupes N-S et E-W du Cas 3, on remarque clairement l'influence de ces phénomènes d'atténuation naturelle par le fait que le panache de polluant dissous est beaucoup plus réduit et ténu que dans les autres simulations (Cas 1 et 2).

Le panache de soluté traverse de manière encore plus atténuée les Argiles de Louvil que pour les deux cas précédents.

En conséquence, pour la durée de simulation considérée (200 ans), le panache polluant qui atteint l'aquifère inférieur crayeux reste très limité et son extension reste faible.

Malgré la prise en compte des phénomènes de l'atténuation naturelle (sorption sur l'ensemble des couches et biodégradation pour la nappe des Graves), la simulation numérique réalisée dans le cas 3 montre encore une fois que l'horizon "imperméable" des Argiles de Louvil, s'il fonctionne toujours comme une "barrière" vis-à-vis des écoulements qui deviennent gravitaires et avec des vitesses très faibles, reste « faiblement perméable » aux polluants dissous qui finissent toujours par traverser, principalement par dispersion/diffusion, cette "barrière".

Pour la Cas 3, le panache résultant affectant la nappe de la Craie est cependant très atténué et reste très localisé par rapport au panache polluant affectant de manière plus prononcée la nappe des Graves.

En résumé : pour la **nappe de la Craie**, la simulation réalisée en prenant en compte les phénomènes de sorption et de biodégradation donne les meilleurs résultats quant au calage avec les valeurs réellement mesurées au droit des piézomètres de suivi implantés dans cette nappe.

5. CONCLUSIONS

Suite aux études initiées en 1999 par ***FSS International r&d***, le ***Cabinet-Conseil BLONDEL*** a réalisé et fait la synthèse des résultats de simulation sur trois modèles hydrodispersifs à partir du cahier des charges défini pour le Cas-Réel 1 fourni par l'**INERIS** dans le cadre du projet **TRANSPOL**.

Pour ce faire, le ***Cabinet-Conseil BLONDEL*** a utilisé l'un des logiciels simulant les écoulements souterrains et le transport de soluté actuellement le plus utilisé et le plus répandu de par le monde : **Visual MODFLOW version 3.0** (WHI-Canada ; 2001-2002), intégrant les codes de calculs MODFLOW-2000, MODPATH et RT3D / MT3DMS / MT3D99.

Les simulations ont été réalisées selon 3 scenarii :

- **Cas 1 (Modèle 1) : Modèle hydrodispersif pur, sans sorption** ;
- **Cas 2 (Modèle 2) : Modèle hydrodispersif avec sorption** ;
- **Cas 3 (Modèle 3) : Modèle hydrodispersif avec sorption et biodégradation**.

Les résultats graphiques et cartographiques de l'ensemble de ces trois modèles sont présentés en annexes du présent rapport, sous la forme de graphes, de cartes et de coupes N-S et E-W.

Dans le premier modèle hydrodispersif (Cas 1), seuls les paramètres convectifs et dispersifs on été considérés pour la simulation en transport de Naphtalène à l'état dissous.

Dans le second modèle hydrodispersif (Cas 2), le paramètre de sorption a été pris en compte en plus des paramètres convectifs et dispersifs afin d'introduire un phénomène de retard dans le transport de Naphtalène à l'état dissous ; ce paramètre de sorption, différent en fonction de l'unité lithologique considérée, a permis d'améliorer le calage entre les valeurs calculées et les valeurs observées des concentrations en Naphtalène dissous au niveau des piézomètres de suivi et de contrôle implantés sur le site.

Dans le troisième modèle hydrodispersif (Cas 3), les paramètres de l'atténuation naturelle, tels que la sorption et la biodégradation, ont été pris en compte en plus des paramètres convectifs et dispersifs afin de reproduire de manière « la plus réaliste » possible les phénomènes liés au transport de soluté en milieu aquifère saturé.

En plus d'un paramètre de sorption spécifique aux différentes unités lithologiques considérées (Cas 2), l'introduction d'un paramètre de biodégradation de ce soluté, au niveau de l'aquifère supérieur des Graves, a permis de réaliser le meilleur calage entre les valeurs calculées et les valeurs observées des concentrations en Naphtalène dissous, au niveau des piézomètres de suivi et de contrôle implantés sur le site. Ce calage est d'ailleurs le meilleur des trois simulations réalisées pour l'aquifère de la nappe de la Craie.

Ce paramètre de biodégradation du soluté de Naphtalène a été appliqué seulement au milieu récepteur potentiellement le plus « aérobie », donc permettant le meilleur développement d'une activité bactérienne, c'est-à-dire au niveau de l'aquifère supérieur des Graves.

Dans les trois cas simulés, le panache polluant de Naphtalène dissous traverse bien l'horizon des Argiles de Louvil (milieu « aquiclude » ou « imperméable ») séparant la nappe superficielle des Graves de la nappe inférieure de la Craie.

On remarque sur l'ensemble des coupes N-S et E-W, et pour l'ensemble des simulations réalisées même si à des degrés moindres, que le panache de polluant dissous traverse les Argiles de Louvil malgré des vitesses d'écoulement faibles et très lentes (écoulement gravitaire par drainance à travers l'horizon "imperméable" argileux).

Ce transfert de soluté à travers une « barrière dite imperméable » est possible si l'on considère les phénomènes de drainance, très lents, et surtout les phénomènes diffusifs (diffusion moléculaire) participant à la dispersion de soluté dans les milieux très peu perméables.

Ces phénomènes, très lents eux aussi, ne nécessitent aucun mouvement convectif ; ils deviennent possibles pour peu que le milieu soit saturé en eau et qu'il existe un gradient de concentration en soluté, par exemple entre le toit « pollué » et le mur « non pollué » d'une couche « semi-perméable à imperméable », comme c'est le cas ici pour les Argiles de Louvil.

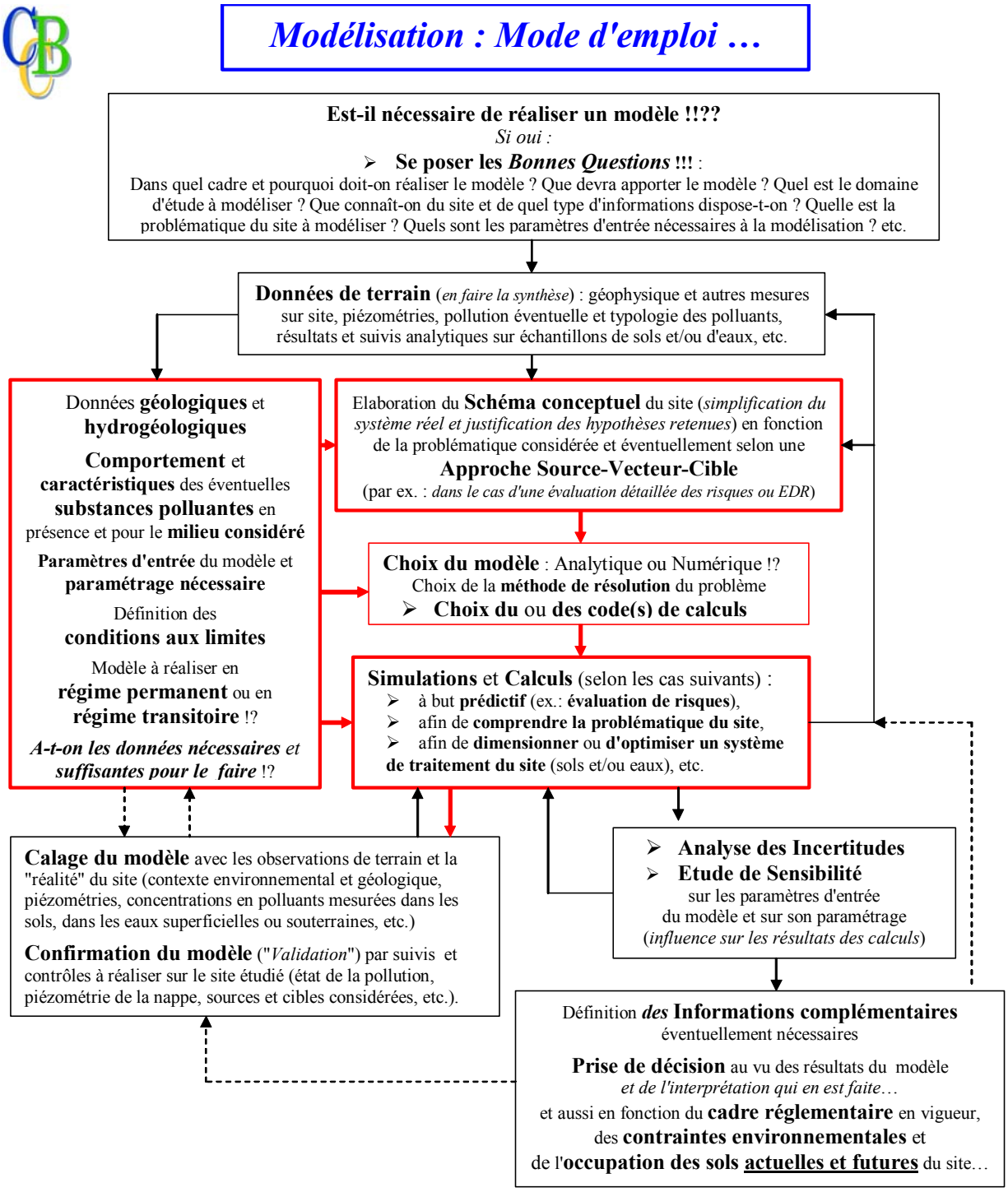
Dans les trois cas simulés, le panache résultant atteint l'aquifère inférieur crayeux avec une atténuation toujours importante, et donc des teneurs assez faibles, surtout dans le Cas 3 , comparée aux teneurs estimées pour l'aquifère superficiel graveleux.
Ce dernier reste, et bien entendu selon les cas considérés, fortement à relativement atteint latéralement par la pollution en soluté de Naphtalène (prise en compte ou non des phénomènes de l'atténuation naturelle).

Les résultats de ces trois modèles montrent que la prise en compte d'un taux de dégradation du soluté de Naphtalène dissous au niveau de l'aquifère supérieur de la nappe des Graves est plutôt un paramètre "favorable" et « plus réaliste » par rapport au risque de transfert, à travers les Argiles de Louvil, vers la **nappe de la craie**.

L' étude de sensibilité réalisée ici sur les paramètres d'entrée du cas-réel 1 montre **un meilleur "calage" entre les résultats des simulations hydrodispersives réalisées et les valeurs de concentrations mesurées dans les eaux souterraines,** au droit des piézomètres de suivi des nappes considérées, dans le cas de la **prise en compte des phénomènes de l'atténuation naturelle, tels que la sorption et la biodégradation.**

Il faut toutefois insister sur le fait que le **calage des simulations**, comme de tout modèle d'ailleurs, sera d'autant meilleur et précis, pour permettre une « confirmation » des modèles, que les **données de suivi sur site seront nombreuses** et, si possible, **mieux réparties dans le temps**.

Annexe A : *Proposition d'une « Charte de Bonne Pratique » pour la réalisation de modélisations en écoulement et en transport de polluants*


Modélisation : Mode d'emploi …
Est-il nécessaire de réaliser un modèle !!??
Si oui :
Se poser les Bonnes Questions !!! :
Dans quel cadre et pourquoi doit-on réaliser le modèle ? Que devra apporter le modèle ? Quel est le domaine d'étude à modéliser ? Que connaît-on du site et de quel type d'informations dispose-t-on ? Quelle est la problématique du site à modéliser ? Quels sont les paramètres d'entrée nécessaires à la modélisation ? etc.
Données de terrain (en faire la synthèse) : géophysique et autres mesures sur site, piézométries, pollution éventuelle et typologie des polluants, résultats et suivis analytiques sur échantillons de sols et/ou d'eaux, etc.
Données géologiques et hydrogéologiques
Comportement et caractéristiques des éventuelles substances polluantes en présence et pour le milieu considéré
Paramètres d'entrée du modèle et paramétrage nécessaire
Définition des conditions aux limites
Modèle à réaliser en régime permanent ou en régime transitoire !?
A-t-on les données nécessaires et suffisantes pour le faire !?
Elaboration du Schéma conceptuel du site (simplification du système réel et justification des hypothèses retenues) en fonction de la problématique considérée et éventuellement selon une Approche Source-Vecteur-Cible
(par ex. : dans le cas d'une évaluation détaillée des risques ou EDR)
Choix du modèle : Analytique ou Numérique !?
Choix de la méthode de résolution du problème
Choix du ou des code(s) de calculs
Simulations et Calculs (selon les cas suivants) :
à but prédictif (ex.: évaluation de risques),
afin de comprendre la problématique du site,
afin de dimensionner ou d'optimiser un système de traitement du site (sols et/ou eaux), etc.
Calage du modèle avec les observations de terrain et la "réalité" du site (contexte environnemental et géologique, piézométries, concentrations en polluants mesurées dans les sols, dans les eaux superficielles ou souterraines, etc.)
Confirmation du modèle ("Validation") par suivis et contrôles à réaliser sur le site étudié (état de la pollution, piézométrie de la nappe, sources et cibles considérées, etc.).
Analyse des Incertitudes
Etude de Sensibilité
sur les paramètres d'entrée du modèle et sur son paramétrage (influence sur les résultats des calculs)
Définition des Informations complémentaires éventuellement nécessaires
Prise de décision au vu des résultats du modèle et de l'interprétation qui en est faite…
et aussi en fonction du cadre réglementaire en vigueur, des contraintes environnementales et de l'occupation des sols actuelles et futures du site…

Thierry BLONDEL*

Cabinet-Conseil BLONDEL (SIRET : 439 192 428 000 19_Code APE : 742C)
Le Parc Technologique de Lyon
12, allée Irène Joliot-Curie – Bâtiment B2
69 791 Saint-Priest Cedex – France
Tél.: 04 78 90 87 60 – Fax : 04 78 90 84 26
Mobile : 06.61.10.96.75 - E-mail : tblondel@aol.com
URL Site Internet : http://www.ccblondel.com
Forum de discussion "Modélisation-Hydrogéologie-Pollution" : http://groups.yahoo.com/group/modhydropoll/

ANNEXES 1-02 à 14-02

Modèle 1 (convection + dispersion) :

Simulation du panache polluant en Naphtalène dissous
(de + 40 ans à + 200 ans),
dans la nappe des Graves et dans la nappe de la Craie
(vues en plan et vues en coupes N-S et E-W).

ANNEXES 15-02 à 28-02

Modèle 2 (convection + dispersion + sorption) :

Simulation du panache polluant en Naphtalène dissous
(de + 40 ans à + 200 ans),
dans la nappe des Graves et dans la nappe de la Craie
(vues en plan et vues en coupes N-S et E-W).

ANNEXES 29-02 à 40-02

Modèle 3 (convection + dispersion + sorption + biodégradation) :

Simulation du panache polluant en Naphtalène dissous (de + 40 ans à + 200 ans), dans la nappe des Graves et dans la nappe de la Craie (vues en plan et vues en coupes N-S et E-W).

ANNEXES 41-02 à 45-02

Modèle 3 (convection + dispersion + sorption + biodégradation) :

- Evolutions simulées des concentrations aux droit des piézomètres implantés dans la nappe des Graves, dans la nappe de la Craie et au droit des points d'observation considérés.
- Histogrammes de calibration des concentrations observées/calculées pour la nappe des Graves et pour la nappe de la Craie.

ANNEXES 46-02 à 48-02

Comparaisons des résultats des trois modèles :

Comparaison des résultats de simulations obtenues par les trois modèles :

- pour la nappe superficielle des Graves,
- pour la nappe de la Craie,
- pour les points d'observations considérés.